

## **Catalysis and Carbon Capture Research Group (Kataliz ve Karbon Yakalama Arařtırmaları Grubu)**

Son yıllarda etkileri daha da kuvvetli hissedilen küresel iklim deęişikliklerinin başlıca sorumlusu olarak görülen karbon dioksit (CO<sub>2</sub>) gazının yakalanması, bu gazın atmosferdeki konsantrasyonunun azaltılması açısından son derece büyük bir önem teşkil etmektedir. Karbon dioksit gazının adsorbanlarla olan etkileşim mekanizmalarının tüm ayrıntılarıyla açıklığa kavuşturulması, CO<sub>2</sub>'i hızlı ve etkin şekilde yakalayacak yüksek performanslı adsorbanların geliştirilebilmesi için kritik bir öneme sahiptir. Diğer yandan, adsorbanlar vasıtasıyla tutulan karbon dioksit gazının hidrojenasyon yoluyla metanol gibi daha değerli ürünlere dönüştürülmesi gibi pek çok kritik kimyasal reaksiyonun başarılabilmesi için katalizörlere ihtiyaç duyulmaktadır. Kataliz ve Karbon Yakalama Arařtırmaları grubu, farklı uygulamalara yönelik (CO oksidasyonu, CO<sub>2</sub> indirgenmesi, vs.) heterojen katalizörlerin tasarımı ve geliştirilmesi, reaksiyon mekanizmaları ve yapı-aktivite ilişkilerinin belirlenmesi, CO<sub>2</sub>'in amin bazlı adsorbanlarla olan etkileşim mekanizmalarının aydınlatılması gibi temel konularda arařtırmalar yürütmektedir.

### **Ortaklıklar**

- Prof. Dr. Ramazan Yıldırım (Boğaziçi Üniversitesi)
- Doç. Dr. M. Erdem Günay (Bilgi Üniversitesi)

### **Projeler**

- Aminle Modifiye Edilmiş Mezoporlu Silika Yapıları Üzerinde Karbondioksit Tutulum Mekanizmalarının Hesaplamalı Yöntemlerle İncelenmesi (**YAP-LP-FEB-19007**)

### **Tezler**

- Topcubaşı, B. Umay, "Theoretical Investigation of CO<sub>2</sub> Adsorption Mechanism over (3-Aminopropyl)Trimethoxysilane-Functionalized Mesoporous Silica Sorbents", MSc Thesis, Yeditepe University, 2019.
- Başaran, Kıvanç, "DFT Modeling of CO<sub>2</sub> Capture Mechanism over (N-Methylaminopropyl)trimethoxysilane-Modified Mesoporous Silica, MSc Thesis, Yeditepe University, (in progress)
- Kalkan, İmge, "Investigation of the Effects of the Amine Structure on the CO<sub>2</sub> Adsorption Mechanism", MSc Thesis, Yeditepe University, (in progress)

### **Yayınlar**

- Yıldız, M. G, T. Davran-Candan, M. E. Günay, R. Yıldırım, "CO<sub>2</sub> capture over amine-

functionalized MCM-41 and SBA-15: Exploratory analysis and decision tree classification of past data”, *Journal of CO2 Utilization*, 31, 27-42, 2019.

- Davran-Candan, T. (2018) CO<sub>2</sub> Capturing Materials. In: Dincer, I. (ed), *Comprehensive Energy Systems*, vol. 2, pp. 881-912. Oxford:Elsevier.
- Davran-Candan, T., “DFT modeling of CO<sub>2</sub> interaction with various aqueous amine structures”, *The Journal of Physical Chemistry A*, 118, 4582-4590, 2014.